مقایسه بانکهای اطلاعات هسته ای با استفاده از کد های PREPRO 2004 و MCNP–4C

دکتر مصطفی صدیقی[۱] ، میثم شهابی زاده[۱]

۱- شرکت تولید و توسعه انرژی اتمی ایران

msadighi@engineer.com
shahabizadeh@gmail.com

چکیده

در این مقاله ، تعدادی از بانک های اطلاعات هسته ای از قبیل ENDF/B-6 ، JEF 3.0 و JENDL 3.3 توسط کد PREPRO 2004 و کتابخانه استاندارد موجود در آن که توسط IAEA توسعه یافته است ، مورد مقایسه قرار گرفته اند. با استفاده از این کد که مجموعه ای از برنامه های کاربردی مختلف می باشد می توان بانک های اطلاعات هسته ای را قبل از استفاده مورد بررسی و ارزیابی قرار داد.

در ادامه پروژه از بانک های اطلاعاتی فوق کتابخانه های مورد نیاز کد MCNP-4C با استفاده از کد NJOY-97 تولید و سپس تعداد ۲۰ مساله راستی آزمایی که توسط کد MCNP-4C شبیه سازی شده است را اجرا کرده و نتایج با یکدیگر و همچنین با مقادیر Benchmark مقایسه شده است.

۱. مقدمه

از آنجائیکه انجام محاسبات دقیق هسته‌ای مستلزم داشتن بانک های اطلاعات هسته‌ای معتبر می‌باشد، بنابراین لازم است ابتدا از صحت بانک های مورد استفاده اطمینان حاصل کنیم. کد PREPRO 2004، یک بسته نرم‌افزاری می‌باشد که به منظور پیش پردازش داده‌های هسته‌ای، به فرمت ENDF مورد استفاده قرار می‌گیرد. موارد استفاده این کد عبارت است از:

۱) بررسی دقیق و تصحیح اطلاعات ارزیابی شده پیش از بکارگیری در کاربردهای مختلف
۲) پیش‌پردازش داده‌ها به گونه‌ای که استفاده‌های بعدی از این داده‌ها ساده‌تر باشد.

در این پروژه با استفاده از این کد بانک های اطلاعات هسته ای موجود با داده‌های استاندارد مقایسه شده است.

بانک های اطلاعات هسته‌ای که مورد بررسی قرار گرفته اند عبارتند از:

ENDF/B-6.0, ENDF/B-6.8, JEF 3.0, JENDL 3.3

در مرحله دوم این پروژه به عنوان بخشی از پروسه اعتبار سنجی، تعداد ۲۰ نمونه راستی آزمایی جهت اجرا توسط کد MCNP انتخاب شده است. [۱]

این تعداد نمونه همه ایزوتوپهای مهم و نیز نواحی مختلف انرژی را تحت پوشش قرار می‌دهد. ضریب تکثیر مؤثر مسائل فوق با استفاده از کد MCNP و بکارگیری کتابخانه‌های هسته‌ای تولید شده، محاسبه شده است.
نتایج بدست آمده براساس نوع مواد بکاربرده شده، متوسط خطاها و همچنین طیف انرژی نوترون دسته‌بندی و مقایسه گردیده است.

۲. اعتبار سنجی بانک های اطلاعات هسته ای با بسته نرم افزاری PRERO 2004

PREPRO 2004 مجموعه‌ای از کدهای کامپیوتری می‌باشد که خواندن و نوشتن داده‌های هسته‌ای ارزیابی شده را در فرمت ENDF انجام می‌دهد.
این بسته توسط IAEA و به منظور پیش پردازش داده‌های به فرمت ENDF (جهت استفاده در کاربردهای مختلف) توسعه یافته است. [۱]
PREPRO 2004 مجموعه‌ای از ۱۶ کد به شرح زیر می‌باشد که هر یک از آنها یک یا چند عملیات مستقل بر روی داده ها انجام می‌دهند:
Linear, Recent, Sigma1, Activate, Legend, Sixpak, Fixup, Dictin, Merger, Groupie, Complot, Evalplot, Mixer, Virgin, Convert, Relabel.

با اجرای برنامه Verify تمامی کدها یکی پس از دیگری اجرا می‌شوند و در انتها با اجرا شدن EVALPLOT و COMPLOT امکان مقایسه دو بانک اطلاعاتی با یکدیگر فراهم می‌شود.
COMPLOT قادر است سطح مقطع‌های محاسبه شده را با مقادیر استاندارد ارائه شده در بسته PREPRO یا با سایر بانک های اطلاعات هسته‌ای مقایسه کند. چنانچه خطای بدست آمده از مقایسه سطح مقاطع در حدود ۱٪ باشد، این خطا قابل قبول بوده و قابل استفاده در سایر کاربردهاست. اگر نیاز به دقت بیشتری باشد، می‌توان با تغییر پارامترهای ورودی به خطای مطلوب رسید.

۳. مقایسه کتابخانه‌های هسته ای کد MCNP با استفاده از نمونه های راستی‌آزمایی حالت بحرانی

به عنوان بخشی از پروسه اعتبارسنجی کتابخانه‌های هسته‌ای کد MCNP مجموعه‌ای از ۲۰ نمونه راستی‌آزمایی انتخاب گردید. در انتخاب این مجموعه، نکات زیر مورد توجه قرار گرفت:

۱) مجموعه مورد نظر تمام طیف انرژی از قبیل انرژی‌های بالا در مجتمع‌های حالت بحرانی سریع و انرژیهای پائین در مجموعه‌های حرارتی را در بر گیرد.
۲) همه ایزوتوپهای مهم و همچنین مواد بکار رفته به عنوان بازتابنده را تحت پوشش قراردهد.

بدین منظور می توان نمونه های فوق را در دو فرمت مختلف تقسیم‌بندی نمود:
در فرمت اول نمونه های راستی‌آزمایی در سه گروه قرار می‌گیرند:

گروه ۱: مجتمع‌های بدون بازتابنده از قبیل: مجتمع‌های فلزی برهنه و نمونه های محلول (Solution Experiments)

گروه ۲: مجتمع‌های دارای بازتابنده شامل:

مجتمع های فلزی با بازتابنده آب، بریلیوم و اکسید بریلیوم و گرافیت

گروه ۳: سایر مجتمع‌ها

فرمت دوم نمونه های راستی‌آزمایی را به ۵ گروه تقسیم می‌کند:

۱. مجتمع‌های U^{233} [1](23umt1, 23umt4a, 23usl1e, 23usl8)
۲. مجتمع‌های U^{235} با غنای متوسط (ieumt1a, ieumt2)
۳. مجتمع‌های U^{235} با غنای بالا (umet1ss, umet3e, umet4a, umet9b, umet19, umet28, usol32)
٤. مجتمع‌های PU^{239} (pumet1, pumet6, pumet8a, pumet10, pumt21b, pnl6)
۵. مجتمع‌های مخلوط فلزی(Mixed Metal Assembly) (mixmet8)

در مجموع تعداد ۲۰ فایل ورودی برای کد MCNP تهیه و با استفاده از ٤ کتابخانه مختلف این کد که توسط کد NJOY97 تولید شده است و همچنین کتابخانه استاندارد MCNP4C ،مقادیر مختلف K_{eff} محاسبه گردید.

این کتابخانه ها عبارتند از:

۱) کتابخانه استاندارد کد MCNP-4C (تولید شده از ENDF/B-6.0)

۲) کتابخانه های تولید شده از : ENDF/B-6.0, ENDF/B-6.8, JEF 3.0, JENDL 3.3

مقادیر متوسط خطای بدست آمده در مجتمع‌های مختلف در جدول ۱ نشان داده شده است.

جدول ۱: مقایسه خطاهای متوسط[۲] در مجتمع های مختلف

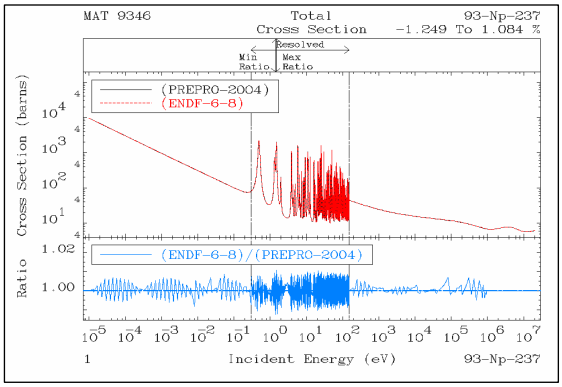
Assemblies	MCNP Std. Lib.	LA-13627 [3]	JENDL 3.3	ENDF 6.8	ENDF 6.0	JEF 3.0
u233	498.75	487.5	347	383.5	500	723.5
ieu 235	313	310	649.5	329.5	265	534
heu 235	332.857	320	350	280.714	273.857	505.428
Pu 239	379	355	597.166	363.833	1898.667	529.333
mixed metal	456	440	640	286	595	1121

[۱] نام فایلهای ورودی کد MCNP در مرجع LA-13594 [۲]

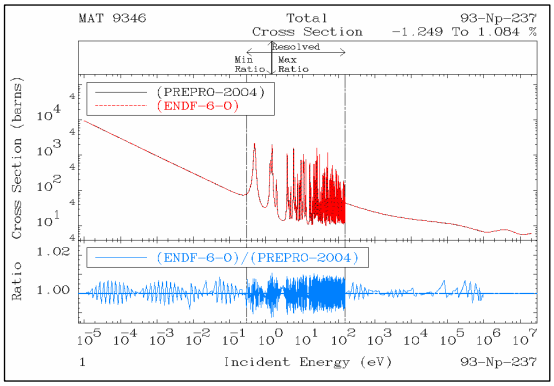
[۲] بر حسب pcm (خطای متوسط از فرمول روبرو محاسبه می گردد $[|k_{eff}-k_{Benchmark}|\times 10^5 / k_{Benchmark}]$)

٤. بررسی نتایج

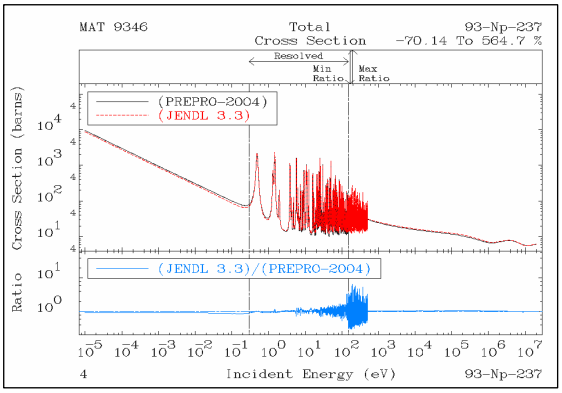
نتایج بدست آمده از محاسبات PREPRO 2004 (شکل های ۱ تا ٤) نشان می‌دهد بانک های اطلاعات هسته‌ای فوق در مقایسه با مقادیر استاندارد کتابخانه PREPRO 2004 دارای خطای قابل قبول (در حدود ۱٪) می‌باشند.



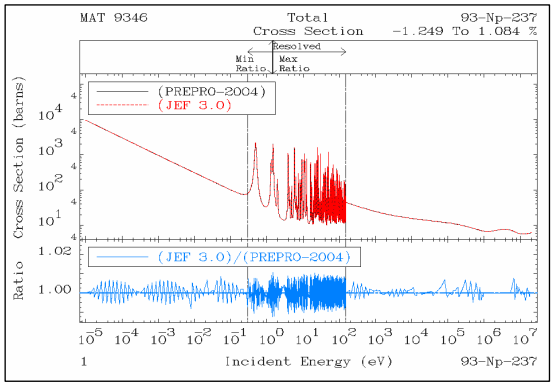
شکل۱. سطح مقطع کل (93-Np-237)
ENDF/B-6.8 در مقایسه با PREPRO-2004



شکل۲. سطح مقطع کل (93-Np-237)
ENDF/B-6.0 در مقایسه با PREPRO-2004



شکل۳. سطح مقطع کل (93-Np-237)
JENDL 3.3 در مقایسه با PREPRO-2004



شکل۴. سطح مقطع کل (93-Np-237)
JEF 3.0 در مقایسه با PREPRO-2004

در بخش دوم نتایج محاسبات K_{eff} با استفاده از کد MCNP-4C (با کتابخانه ENDF/B-6.0) در مقایسه با نتایج ارائه شده در مرجع LA-13627 مطابقت خوبی را نشان می‌دهد. بنابراین صحت کد MCNP-4C موجود به همراه کتابخانه استاندارد آن مورد تائید قرار می‌گیرد. در خصوص کتابخانه‌های تولید شده توسط کد NJOY-97 با بانک های اطلاعات هسته‌ای مختلف، نتایج محاسبات K_{eff} را می‌توان به سه روش زیر با یکدیگر مقایسه کرد:

۱) مقایسه نتایج براساس مواد بکار رفته در نمونه‌های آزمایشی

نتایج این دسته‌بندی در جدول ۲ آمده است. در این جدول بانک های مختلف بر اساس کمتر بودن میزان خطا دسته بندی شده اند.

۲) مقایسه نتایج براساس محاسبه میانگین خطا با در نظر گرفتن همه نمونه‌های آزمایشی

نتایج این مقایسه در جدول ۳ آمده است. با توجه به این مقایسه دیده می‌شود که کمترین خطا مربوط به بانک اطلاعاتی ENDF/B-6.8 می باشد. بررسی نتایج فوق نشان می‌دهد که تنها مشکل استفاده از بانک اطلاعاتی ENDF/B-6.0 مربوط به نمونه‌های آزمایشی حاوی ایزوتوپ‌های Pu میباشد، که با حذف این نمونه‌ها می‌توان این بانک اطلاعاتی را در ردیف دوم پس از ENDF/B-6.8 قرار داد.

۳) مقایسه نتایج براساس طیف انرژی نوترون

نتایج مقایسه در جدول ٤ آمده است و نشان می‌دهد بهترین جواب مربوط به ENDF/B-6.8 است.

اگر چه در ناحیه حرارتی جواب مربوط به ENDF/B-6.0 بهتر از ENDF/B-6.8 می باشد اما به خاطر اینکه تعداد نمونه‌های آزمایشی در این ناحیه کافی نبوده است، به سادگی نمی‌توان قضاوت کرد که این بانک اطلاعاتی بهترین مرجع در ناحیه حرارتی است.

جدول ۲: دسته بندی کتابخانه های اطلاعات هسته ای

Assemblies	1	2	3	4
u233	JENDL 3.3	ENDF 6.8	ENDF 6.0	JEF 3.0
ieu 235	ENDF 6.0	ENDF 6.8	JEF 3.0	JENDL 3.3
heu 235	ENDF 6.0	ENDF 6.8	JENDL 3.3	JEF 3.0
Pu 239	ENDF 6.8	JEF 3.0	JENDL 3.3	ENDF 6.0
mixed metal	ENDF 6.8	JEF 3.0	JENDL 3.3	JEF 3.0

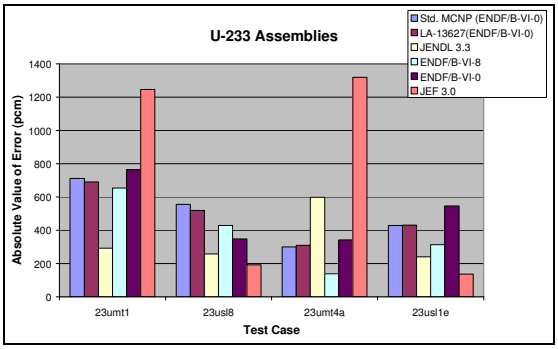
جدول ۳: دسته بندی کلی کتابخانه های اطلاعات هسته ای

Assemblies	1	2	3	4
All test Cases	ENDF 6.8	JENDL 3.3	JEF 3.0	ENDF 6.0
without Pu Assemblies	ENDF 6.8	ENDF 6.0	JENDL 3.3	JEF 3.0

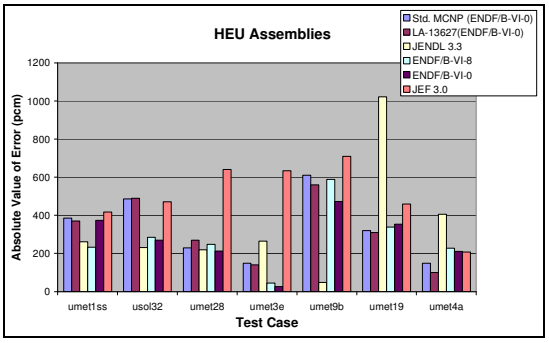
جدول ۴: مقایسه خطاهای متوسط K_{eff} بر حسب pcm مربوط به کتابخانه های اطلاعات هسته ای بر اساس طیف نوترون

Neutron Spectrum	MCNP Std. Lib.	LA-13627	JENDL 3.3	ENDF 6.8	ENDF 6.0	JEF 3.0
FAST	375.375	358.75	508.062	335.625	953.9375	657.062
THERMAL	418.75	410	307.75	314.25	292.75	321

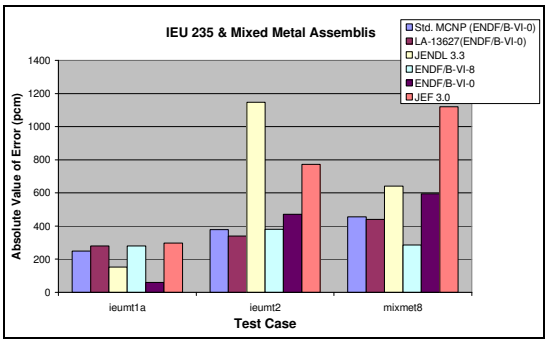
شکل‌های ۵ تا ۸ خطاهای نتایج محاسبه K_{eff} را در براساس تقسیم‌بندی پنج‌گانه (بخش ۳) نشان می‌دهد..



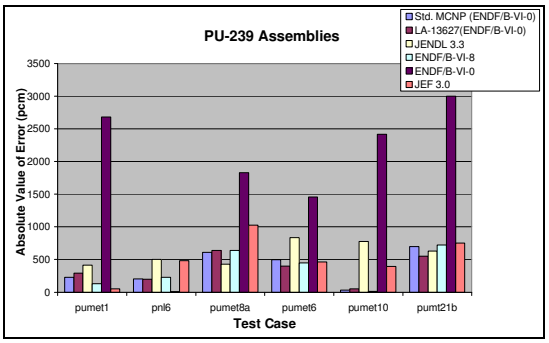
شکل ۵. خطای متوسط K_{eff} مربوط به مجتمع های حاوی U-233



شکل ۶. خطای متوسط K_{eff} مربوط به مجتمع های حاوی U-235 با غنای زیاد



شکل ۷. خطای متوسط K_{eff} مربوط به مجتمع های حاوی U-235 با غنای متوسط و مخلوط فلزی



شکل ۸. خطای متوسط K_{eff} مربوط به مجتمع های حاوی Pu-239

۵. نتیجه‌گیری

در این پژوهش اعتبار بانک های اطلاعات هسته‌ای مختلف از طریق مقایسه با اطلاعات استاندارد مورد تائید قرار گرفت و نشان داده شد که گر چه همه آنها قابل اعتمادند، اما نتایج محاسبات K_{eff} مربوط به نمونه‌های بحرانی با یکدیگر متفاوت می‌باشند. لذا توصیه می‌شود که با توجه به کاربردهای مختلف، نوع مواد بکار رفته و یا طیف انرژی مورد نظر، بانک اطلاعات هسته‌ای مناسب بکار گرفته شود.

مراجع

[1] D.E. Cullen, "PREPRO 2004: 2004 ENDF/B Pre-processing Codes", report IAEA-NDS-39, Rev. 12, Nov. 22, 2004

[2] S.C. Frankle, "A Suite of Criticality Benchmarks for Validating Nuclear Data", Los Alamos National Laboratory report LA-13594

[3] S.C. Frankle, "Criticality Benchmark Results Using Various MCNP Data Libraries", Los Alamos National Laboratory report LA-13627